```
data_platon1

_publ_section_comment
;
The quality of data collected was poor, this caused a number of
problems in the refinement which could
not be resolved. The structure was solved with most atoms isotropic
and problems were encountered due to disorder.
The atom Si2 gave the structure a large parameter shift, however this
problem could not be fixed and the atom must
be present to make chemical sense.
A H+ ion must be present in the structure to balance the charge, this
is most likely coordinating between the P=O
groups at the top of the anion, however it can not be seen due to the
quality of the data.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             ?
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C42 H88 N9 O42 P2 Si W10'
_chemical_formula_weight          3319.74

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0033   0.0016
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0061   0.0033
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0106   0.0060
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.1023   0.0942
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.0817   0.0704
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -0.8490   6.8722
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'P 2/c'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, y, -z+1/2'
 '-x, -y, -z'
 'x, -y, z-1/2'

_cell_length_a                    24.616(11)
_cell_length_b                    10.758(5)
_cell_length_c                    32.647(15)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  108.42(2)
```

```
_cell_angle_gamma                  90.00
_cell_volume                       8203(6)
_cell_formula_units_Z              4
_cell_measurement_temperature      293(2)
_cell_measurement_reflns_used      ?
_cell_measurement_theta_min        0.9
_cell_measurement_theta_max        22.4

_exptl_crystal_description         Fragment
_exptl_crystal_colour              Colourless
_exptl_crystal_size_max            0.04
_exptl_crystal_size_mid            0.04
_exptl_crystal_size_min            0.02
_exptl_crystal_density_meas        ?
_exptl_crystal_density_diffrn      2.688
_exptl_crystal_density_method      'not measured'
_exptl_crystal_F_000               6092
_exptl_absorpt_coefficient_mu      26.103
_exptl_absorpt_correction_type     empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min    0.6023
_exptl_absorpt_correction_T_max    0.7657
_exptl_absorpt_process_details     'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature        293(2)
_diffrn_radiation_wavelength       1.54178
_diffrn_radiation_type             CuK\a
_diffrn_radiation_source           'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator    graphite
_diffrn_measurement_device_type    'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method         'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean   ?
_diffrn_standards_number           ?
_diffrn_standards_interval_count   ?
_diffrn_standards_interval_time    ?
_diffrn_standards_decay_%          ?
_diffrn_reflns_number              29125
_diffrn_reflns_av_R_equivalents    0.0899
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI      0.0922
_diffrn_reflns_limit_h_min         -21
_diffrn_reflns_limit_h_max         20
_diffrn_reflns_limit_k_min         -11
_diffrn_reflns_limit_k_max         10
_diffrn_reflns_limit_l_min         -27
_diffrn_reflns_limit_l_max         33
_diffrn_reflns_theta_min           0.87
_diffrn_reflns_theta_max           22.38
_reflns_number_total               7917
_reflns_number_gt                  3549
_reflns_threshold_expression       >2sigma(I)

_computing_data_collection         Smart
_computing_cell_refinement         Saintplus
_computing_data_reduction          Saintplus
_computing_structure_solution      Shelxtl
_computing_structure_refinement    'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
```

```
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.1343P)^2^+0.0000P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          7917
_refine_ls_number_parameters      482
_refine_ls_number_restraints      47
_refine_ls_R_factor_all           0.1383
_refine_ls_R_factor_gt            0.0825
_refine_ls_wR_factor_ref          0.2815
_refine_ls_wR_factor_gt           0.2429
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.126
_refine_ls_restrained_S_all       1.123
_refine_ls_shift/su_max           1.020
_refine_ls_shift/su_mean          0.052

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.482(3) 0.071(4) 0.1278(12) 0.027(15) Uiso 1 1 d DU . .
H1A H 0.5168 0.0224 0.1328 0.033 Uiso 1 1 calc R . .
H1B H 0.4506 0.0148 0.1252 0.033 Uiso 1 1 calc R . .
C1S C 0.128(4) 0.564(7) 0.098(3) 0.08(2) Uiso 1 1 d U . .
C2 C 0.471(2) 0.146(4) 0.0857(11) 0.018(13) Uiso 1 1 d DU . .
H2A H 0.4399 0.2040 0.0827 0.022 Uiso 1 1 calc R . .
H2B H 0.5049 0.1921 0.0862 0.022 Uiso 1 1 calc R . .
C2S C 0.160(3) 0.631(8) 0.140(2) 0.13(4) Uiso 1 1 d DU . .
H2S1 H 0.1960 0.6608 0.1385 0.195 Uiso 1 1 calc R . .
H2S2 H 0.1664 0.5744 0.1638 0.195 Uiso 1 1 calc R . .
H2S3 H 0.1374 0.7000 0.1441 0.195 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 0.455(3) 0.055(5) 0.0475(14) 0.039(16) Uiso 1 1 d DU . .
C3S C 0.290(4) 0.757(7) 0.059(3) 0.11(3) Uiso 1 1 d U . .
C4 C 0.017(3) 0.574(5) 0.3699(15) 0.06(2) Uiso 1 1 d DU . .
H4A H -0.0190 0.5287 0.3651 0.070 Uiso 1 1 calc R . .
H4B H 0.0464 0.5138 0.3711 0.070 Uiso 1 1 calc R . .
```

C4S C 0.246(3) 0.774(7) 0.069(2) 0.09(2) Uiso 1 1 d DU . .
H4S1 H 0.2227 0.8351 0.0498 0.141 Uiso 1 1 calc R . .
H4S2 H 0.2560 0.8041 0.0982 0.141 Uiso 1 1 calc R . .
H4S3 H 0.2253 0.6978 0.0664 0.141 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.031(3) 0.641(5) 0.4139(15) 0.042(18) Uiso 1 1 d DU . .
H5A H 0.0635 0.6961 0.4166 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
H5B H -0.0010 0.6920 0.4141 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
C5S C 0.624(4) 0.064(7) 0.094(3) 0.08(2) Uiso 1 1 d U . .
C6 C 0.046(5) 0.556(10) 0.453(3) 0.12(4) Uiso 1 1 d U . .
C6S C 0.660(3) 0.121(7) 0.137(2) 0.11(3) Uiso 1 1 d DU . .
H6S1 H 0.6992 0.1282 0.1375 0.159 Uiso 1 1 calc R . .
H6S2 H 0.6586 0.0689 0.1607 0.159 Uiso 1 1 calc R . .
H6S3 H 0.6458 0.2022 0.1406 0.159 Uiso 1 1 calc R . .
C7S C 0.221(4) 0.566(8) 0.524(3) 0.14(4) Uiso 1 1 d DU . .
H7S1 H 0.2596 0.5783 0.5435 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
H7S2 H 0.2231 0.5352 0.4971 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
H7S3 H 0.2021 0.5061 0.5367 0.206 Uiso 1 1 calc R . .
C8S C 0.189(4) 0.690(8) 0.517(3) 0.12(4) Uiso 1 1 d DU . .
C9 C 0.271(4) -0.040(7) 0.174(3) 0.12(3) Uiso 1 1 d U . .
H9A H 0.2561 -0.0731 0.1444 0.147 Uiso 1 1 calc R . .
H9B H 0.3113 -0.0621 0.1842 0.147 Uiso 1 1 calc R . .
C9S C 0.776(2) 0.270(5) 0.064(2) 0.08(2) Uiso 1 1 d DU . .
C10 C 0.244(3) -0.100(6) 0.198(2) 0.06(2) Uiso 1 1 d U . .
H10A H 0.2530 -0.1872 0.1985 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.2039 -0.0878 0.1861 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H10C H 0.2577 -0.0676 0.2269 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
C10S C 0.831(2) 0.228(5) 0.0545(18) 0.060(17) Uiso 1 1 d DU . .
H10D H 0.8373 0.1415 0.0613 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H10E H 0.8628 0.2758 0.0715 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
H10F H 0.8257 0.2409 0.0244 0.090 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.206(4) 0.126(5) 0.145(3) 0.13(4) Uiso 1 1 d DU . .
H11A H 0.1819 0.0944 0.1617 0.156 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.1966 0.0783 0.1188 0.156 Uiso 1 1 calc R . .
C11S C 0.686(5) -0.200(8) 0.016(4) 0.15(4) Uiso 1 1 d DU . .
C12 C 0.191(2) 0.262(5) 0.1343(18) 0.056(19) Uiso 1 1 d DU . .
H12A H 0.1509 0.2690 0.1180 0.084 Uiso 1 1 calc R . .
H12B H 0.2134 0.2933 0.1174 0.084 Uiso 1 1 calc R . .
H12C H 0.1987 0.3095 0.1604 0.084 Uiso 1 1 calc R . .
C12S C 0.720(3) -0.077(7) 0.021(3) 0.10(3) Uiso 1 1 d DU . .
H12D H 0.7219 -0.0508 -0.0063 0.150 Uiso 1 1 calc R . .
H12E H 0.7574 -0.0887 0.0409 0.150 Uiso 1 1 calc R . .
H12F H 0.7000 -0.0151 0.0323 0.150 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.280(2) 0.162(8) 0.213(2) 0.10(3) Uiso 1 1 d DU . .
H13A H 0.2526 0.1333 0.2273 0.124 Uiso 1 1 calc R . .
H13B H 0.2750 0.2517 0.2097 0.124 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 0.341(2) 0.135(5) 0.2433(17) 0.039(17) Uiso 1 1 d DU . .
H14A H 0.3474 0.1754 0.2706 0.059 Uiso 1 1 calc R . .
H14B H 0.3684 0.1654 0.2301 0.059 Uiso 1 1 calc R . .
H14C H 0.3460 0.0468 0.2477 0.059 Uiso 1 1 calc R . .
C15 C 0.308(3) 0.162(6) 0.148(2) 0.08(2) Uiso 1 1 d U . .
H15A H 0.3060 0.2515 0.1483 0.096 Uiso 1 1 calc R . .
H15B H 0.3476 0.1379 0.1635 0.096 Uiso 1 1 calc R . .
C16 C 0.292(3) 0.114(6) 0.100(2) 0.08(2) Uiso 1 1 d U . .
H16A H 0.3189 0.1465 0.0871 0.117 Uiso 1 1 calc R . .
H16B H 0.2542 0.1425 0.0845 0.117 Uiso 1 1 calc R . .
H16C H 0.2931 0.0252 0.1001 0.117 Uiso 1 1 calc R . .
C17 C 0.219(4) 0.465(4) 0.324(3) 0.13(4) Uiso 1 1 d DU . .
H17A H 0.2266 0.4260 0.3521 0.159 Uiso 1 1 calc R . .
H17B H 0.1784 0.4554 0.3086 0.159 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.253(3) 0.398(6) 0.299(2) 0.06(2) Uiso 1 1 d DU . .
H18A H 0.2438 0.3110 0.2970 0.091 Uiso 1 1 calc R . .
H18B H 0.2934 0.4080 0.3138 0.091 Uiso 1 1 calc R . .
H18C H 0.2441 0.4325 0.2706 0.091 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.219(3) 0.658(7) 0.286(2) 0.08(3) Uiso 1 1 d DU . .
H19A H 0.2460 0.6255 0.2728 0.101 Uiso 1 1 calc R . .
H19B H 0.2245 0.7471 0.2890 0.101 Uiso 1 1 calc R . .

C20 C 0.158(3) 0.632(7) 0.256(2) 0.08(3) Uiso 1 1 d DU . .
H20A H 0.1522 0.6715 0.2290 0.116 Uiso 1 1 calc R . .
H20B H 0.1307 0.6633 0.2693 0.116 Uiso 1 1 calc R . .
H20C H 0.1526 0.5436 0.2521 0.116 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 0.189(5) 0.671(12) 0.347(4) 0.21(6) Uiso 1 1 d U . .
H21A H 0.1507 0.6499 0.3296 0.249 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.1941 0.7607 0.3457 0.249 Uiso 1 1 calc R . .
C22 C 0.202(3) 0.627(6) 0.3950(18) 0.08(2) Uiso 1 1 d DU . .
H22A H 0.1752 0.6675 0.4070 0.119 Uiso 1 1 calc R . .
H22B H 0.2400 0.6489 0.4116 0.119 Uiso 1 1 calc R . .
H22C H 0.1967 0.5389 0.3956 0.119 Uiso 1 1 calc R . .
C23 C 0.293(4) 0.638(8) 0.351(3) 0.14(4) Uiso 1 1 d U . .
H23A H 0.3073 0.5839 0.3757 0.166 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.3129 0.6137 0.3307 0.166 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.312(3) 0.755(6) 0.365(2) 0.08(2) Uiso 1 1 d DU . .
H24A H 0.3521 0.7524 0.3801 0.117 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.2916 0.7853 0.3833 0.117 Uiso 1 1 calc R . .
H24C H 0.3051 0.8091 0.3402 0.117 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C -0.004(7) 0.141(2) 0.4916(19) 0.14(7) Uiso 0.51(7) 1 d PDU . .
H25A H -0.0318 0.1777 0.5036 0.167 Uiso 0.51(7) 1 calc PR . .
H25B H 0.0327 0.1800 0.5054 0.167 Uiso 0.51(7) 1 calc PR . .
C25A C -0.040(6) -0.049(18) 0.443(5) 0.17(9) Uiso 0.49(7) 1 d PDU . .
H25C H -0.0184 -0.1048 0.4309 0.208 Uiso 0.49(7) 1 calc PR . .
H25D H -0.0776 -0.0842 0.4402 0.208 Uiso 0.49(7) 1 calc PR . .
C26 C -0.023(4) 0.164(6) 0.443(2) 0.03(3) Uiso 0.51(7) 1 d PDU . .
H26A H -0.0258 0.2516 0.4369 0.039 Uiso 0.51(7) 1 calc PR . .
H26B H -0.0592 0.1251 0.4292 0.039 Uiso 0.51(7) 1 calc PR . .
H26C H 0.0052 0.1288 0.4310 0.039 Uiso 0.51(7) 1 calc PR . .
C26A C -0.04(4) 0.09(3) 0.426(6) 1.2(12) Uiso 0.49(7) 1 d PDU . .
H26D H -0.0660 0.0879 0.3967 1.767 Uiso 0.49(7) 1 calc PR . .
H26E H -0.0047 0.1129 0.4290 1.767 Uiso 0.49(7) 1 calc PR . .
H26F H -0.0589 0.1380 0.4432 1.767 Uiso 0.49(7) 1 calc PR . .
C27 C 0.058(2) -0.041(13) 0.495(6) 0.7(3) Uiso 1 1 d DU . .
H27A H 0.0663 -0.1258 0.5047 0.827 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.0560 -0.0358 0.4649 0.827 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.1038(16) 0.048(10) 0.523(4) 0.18(5) Uiso 1 1 d DU . .
H28A H 0.1370 0.0445 0.5132 0.272 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.1141 0.0232 0.5523 0.272 Uiso 1 1 calc R . .
H28C H 0.0891 0.1312 0.5195 0.272 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.491(5) 0.536(6) 0.043(2) 0.37(10) Uiso 1 1 d DU . .
H29A H 0.5127 0.4804 0.0658 0.443 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.4511 0.5308 0.0406 0.443 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.513(4) 0.671(5) 0.053(2) 0.12(3) Uiso 1 1 d DU . .
H30A H 0.4821 0.7223 0.0553 0.186 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.5268 0.7010 0.0309 0.186 Uiso 1 1 calc R . .
H30C H 0.5434 0.6721 0.0804 0.186 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.464(3) 0.590(8) -0.035(3) 0.08(4) Uiso 0.58(8) 1 d PDU . .
H31A H 0.4772 0.6749 -0.0278 0.098 Uiso 0.58(8) 1 calc PR . .
H31B H 0.4663 0.5688 -0.0628 0.098 Uiso 0.58(8) 1 calc PR . .
C31A C 0.447(3) 0.419(9) -0.003(5) 0.09(6) Uiso 0.42(8) 1 d PDU . .
H31C H 0.4499 0.3880 0.0259 0.104 Uiso 0.42(8) 1 calc PR . .
H31D H 0.4453 0.3490 -0.0216 0.104 Uiso 0.42(8) 1 calc PR . .
C32 C 0.402(2) 0.578(11) -0.034(3) 0.10(4) Uiso 0.58(8) 1 d PDU . .
H32A H 0.3873 0.6579 -0.0298 0.144 Uiso 0.58(8) 1 calc PR . .
H32B H 0.4006 0.5230 -0.0112 0.144 Uiso 0.58(8) 1 calc PR . .
H32C H 0.3782 0.5440 -0.0612 0.144 Uiso 0.58(8) 1 calc PR . .
C32A C 0.394(5) 0.502(12) -0.020(4) 0.06(4) Uiso 0.42(8) 1 d PDU . .
H32D H 0.3603 0.4540 -0.0233 0.083 Uiso 0.42(8) 1 calc PR . .
H32E H 0.3930 0.5354 -0.0477 0.083 Uiso 0.42(8) 1 calc PR . .
H32F H 0.3959 0.5694 -0.0003 0.083 Uiso 0.42(8) 1 calc PR . .
N1 N 0.2667(18) 0.103(3) 0.1707(12) 0.021(11) Uiso 1 1 d DU . .
N1S N 0.098(3) 0.533(7) 0.064(2) 0.11(3) Uiso 1 1 d DU . .
N2 N 0.233(2) 0.604(4) 0.3304(13) 0.032(13) Uiso 1 1 d DU . .
N2S N 0.342(4) 0.726(12) 0.049(4) 0.28(6) Uiso 1 1 d DU . .
N3 N 0.0000 0.0000 0.5000 0.09(3) Uiso 1 2 d SDU . .
N3S N 0.594(3) 0.037(7) 0.060(2) 0.13(3) Uiso 1 1 d DU . .

```
N4 N 0.5000 0.5000 0.0000 0.09(3) Uiso 1 2 d SDU . .
N4S N 0.165(7) 0.783(11) 0.506(6) 0.41(11) Uiso 1 1 d DU . .
N5S N 0.734(3) 0.278(9) 0.073(4) 0.25(6) Uiso 1 1 d DU . .
N6S N 0.650(6) -0.277(11) 0.004(6) 0.38(9) Uiso 1 1 d DU . .
O1 O 0.5925(15) 0.867(3) 0.1811(10) 0.018(9) Uiso 1 1 d U . .
O2 O 0.5844(16) 0.845(3) 0.2653(11) 0.027(10) Uiso 1 1 d U . .
O3 O 0.4933(14) 0.784(2) 0.1955(9) 0.005(7) Uiso 1 1 d U . .
O4 O 0.3882(15) 0.867(3) 0.1448(10) 0.023(9) Uiso 1 1 d U . .
O5 O 0.6465(14) 0.671(3) 0.2350(9) 0.009(8) Uiso 1 1 d U . .
O6 O 0.5563(14) 0.615(3) 0.1721(9) 0.012(9) Uiso 1 1 d U . .
O7 O 0.4201(14) 0.613(3) 0.1479(10) 0.015(9) Uiso 1 1 d U . .
O8 O 0.5560(14) 0.618(3) 0.2589(10) 0.019(9) Uiso 1 1 d U . .
O9 O 0.6557(13) 0.670(2) 0.3153(9) 0.008(8) Uiso 1 1 d U . .
O10 O 0.7206(16) 0.500(3) 0.2899(10) 0.028(10) Uiso 1 1 d U . .
O11 O 0.6135(14) 0.437(3) 0.2271(9) 0.010(8) Uiso 1 1 d U . .
O12 O 0.5992(16) 0.415(3) 0.1381(11) 0.029(10) Uiso 1 1 d U . .
O13 O 0.4865(14) 0.442(3) 0.1275(9) 0.017(9) Uiso 1 1 d U . .
O14 O 0.3695(16) 0.418(3) 0.0965(11) 0.034(10) Uiso 1 1 d U . .
O15 O 0.3724(14) 0.435(3) 0.1859(10) 0.020(9) Uiso 1 1 d U . .
O16 O 0.4947(14) 0.453(3) 0.2062(9) 0.014(8) Uiso 1 1 d U . .
O17 O 0.5445(15) 0.259(3) 0.1776(10) 0.025(9) Uiso 1 1 d U . .
O18 O 0.4374(15) 0.259(3) 0.1621(9) 0.020(9) Uiso 1 1 d U . .
O19 O 0.4952(16) 0.092(3) 0.2122(11) 0.032(10) Uiso 1 1 d U . .
O20 O 0.458(2) 0.106(4) 0.0112(16) 0.078(16) Uiso 1 1 d U . .
O21 O 0.431(2) -0.044(5) 0.0480(17) 0.099(18) Uiso 1 1 d U . .
O22 O 0.1145(15) 1.368(3) 0.3555(10) 0.025(10) Uiso 1 1 d U . .
O23 O 0.0052(16) 1.283(3) 0.3056(10) 0.020(9) Uiso 1 1 d U . .
O24 O -0.0940(17) 1.369(3) 0.3186(11) 0.032(11) Uiso 1 1 d U . .
O25 O -0.0860(15) 1.352(3) 0.2342(10) 0.017(9) Uiso 1 1 d U . .
O26 O 0.0797(16) 1.117(3) 0.3507(11) 0.030(11) Uiso 1 1 d U . .
O27 O -0.0585(15) 1.118(3) 0.3274(10) 0.019(9) Uiso 1 1 d U . .
O28 O -0.1476(16) 1.177(3) 0.2642(11) 0.025(10) Uiso 1 1 d U . .
O29 O -0.1560(15) 1.175(3) 0.1822(10) 0.021(9) Uiso 1 1 d U . .
O30 O -0.0560(16) 1.123(3) 0.2386(11) 0.029(10) Uiso 1 1 d U . .
O31 O -0.2210(16) 1.001(3) 0.2114(11) 0.030(10) Uiso 1 1 d U . .
O32 O -0.1154(14) 0.936(3) 0.2723(9) 0.017(9) Uiso 1 1 d U . .
O33 O -0.1021(16) 0.915(3) 0.3599(10) 0.028(10) Uiso 1 1 d U . .
O34 O 0.0132(15) 0.935(3) 0.3715(10) 0.024(9) Uiso 1 1 d U . .
O35 O 0.1321(17) 0.915(3) 0.4002(12) 0.042(11) Uiso 1 1 d U . .
O36 O 0.1242(15) 0.933(3) 0.3139(10) 0.024(9) Uiso 1 1 d U . .
O37 O 0.0040(17) 0.948(3) 0.2910(11) 0.038(11) Uiso 1 1 d U . .
O38 O -0.0458(15) 0.755(3) 0.3206(10) 0.026(9) Uiso 1 1 d U . .
O39 O 0.0641(16) 0.762(3) 0.3397(10) 0.030(10) Uiso 1 1 d U . .
O40 O 0.004(2) 0.597(4) 0.2880(14) 0.058(14) Uiso 1 1 d U . .
O41 O 0.041(2) 0.608(5) 0.4885(18) 0.091(18) Uiso 1 1 d U . .
O42 O 0.069(3) 0.460(8) 0.452(3) 0.16(3) Uiso 1 1 d U . .
P1 P 0.4901(7) 0.1744(13) 0.1729(4) 0.020(4) Uiso 1 1 d U . .
P2 P 0.0094(8) 0.6744(13) 0.3261(5) 0.025(4) Uiso 1 1 d U . .
Si1 Si 0.0000 1.030(2) 0.2500 0.036(7) Uiso 1 2 d SU . .
Si2 Si 0.5000 0.5302(15) 0.2500 0.000(5) Uiso 1 2 d SU . .
W1 W 0.57478(12) 0.7596(2) 0.21138(7) 0.0281(8) Uani 1 1 d U . .
W2 W 0.41473(12) 0.7593(2) 0.18377(7) 0.0279(7) Uiso 1 1 d U . .
W3 W 0.65082(12) 0.5400(2) 0.27703(7) 0.0276(8) Uani 1 1 d U . .
W4 W 0.55928(12) 0.4398(2) 0.17162(7) 0.0257(7) Uiso 1 1 d U . .
W5 W 0.41949(12) 0.4398(2) 0.14658(7) 0.0268(8) Uani 1 1 d U . .
W6 W 0.08565(12) 1.2595(3) 0.31651(8) 0.0367(9) Uani 1 1 d U . .
W7 W -0.07512(12) 1.2602(3) 0.28827(8) 0.0360(8) Uani 1 1 d U . .
W8 W 0.08019(12) 0.9404(2) 0.35352(8) 0.0343(8) Uani 1 1 d U . .
W9 W -0.05945(13) 0.9400(2) 0.32806(8) 0.0343(8) Uiso 1 1 d U . .
W10 W -0.15076(12) 1.0403(2) 0.22269(8) 0.0332(9) Uani 1 1 d U . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
```

```
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
W1 0.033(2) 0.0286(15) 0.0243(12) 0.0041(12) 0.0109(14) -0.0002(16)
W3 0.022(2) 0.0344(16) 0.0257(13) 0.0006(11) 0.0060(14) 0.0004(15)
W5 0.024(2) 0.0327(15) 0.0195(12) -0.0027(11) 0.0014(13) -0.0007(15)
W6 0.0287(17) 0.0408(13) 0.0375(13) -0.0120(9) 0.0062(11) -0.0077(10)
W7 0.030(2) 0.0371(16) 0.0404(15) -0.0035(14) 0.0100(15) 0.0037(17)
W8 0.024(2) 0.0441(17) 0.0313(14) 0.0018(13) 0.0041(15) 0.0017(17)
W10 0.023(2) 0.0410(17) 0.0339(14) 0.0011(13) 0.0061(15) -0.0001(16)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.537(19) . ?
C1 P1 1.80(5) . ?
C1 H1A 0.9700 . ?
C1 H1B 0.9700 . ?
C1S N1S 1.19(8) . ?
C1S C2S 1.52(8) . ?
C2 C3 1.53(2) . ?
C2 H2A 0.9700 . ?
C2 H2B 0.9700 . ?
C2S H2S1 0.9602 . ?
C2S H2S2 0.9602 . ?
C2S H2S3 0.9602 . ?
C3 O21 1.22(6) . ?
C3 O20 1.33(6) . ?
C3S C4S 1.23(9) . ?
C3S N2S 1.46(9) . ?
C4 C5 1.54(2) . ?
C4 P2 1.76(6) . ?
C4 H4A 0.9700 . ?
C4 H4B 0.9700 . ?
C4S H4S1 0.9600 . ?
C4S H4S2 0.9600 . ?
C4S H4S3 0.9600 . ?
C5 C6 1.52(9) . ?
C5 H5A 0.9700 . ?
C5 H5B 0.9700 . ?
C5S N3S 1.16(8) . ?
C5S C6S 1.54(8) . ?
C6 O42 1.18(11) . ?
C6 O41 1.33(10) . ?
C6S H6S1 0.9602 . ?
C6S H6S2 0.9601 . ?
C6S H6S3 0.9602 . ?
```

```
C7S C8S 1.544(18) . ?
C7S H7S1 0.9617 . ?
C7S H7S2 0.9617 . ?
C7S H7S3 0.9617 . ?
C8S N4S 1.155(18) . ?
C9 C10 1.35(8) . ?
C9 N1 1.55(8) . ?
C9 H9A 0.9700 . ?
C9 H9B 0.9700 . ?
C9S N5S 1.160(18) . ?
C9S C10S 1.547(17) . ?
C10 H10A 0.9600 . ?
C10 H10B 0.9600 . ?
C10 H10C 0.9600 . ?
C10S H10D 0.9600 . ?
C10S H10E 0.9600 . ?
C10S H10F 0.9600 . ?
C11 N1 1.49(9) . ?
C11 C12 1.53(2) . ?
C11 H11A 0.9700 . ?
C11 H11B 0.9700 . ?
C11S N6S 1.18(6) . ?
C11S C12S 1.54(2) . ?
C12 H12A 0.9600 . ?
C12 H12B 0.9600 . ?
C12 H12C 0.9600 . ?
C12S H12D 0.9607 . ?
C12S H12E 0.9607 . ?
C12S H12F 0.9607 . ?
C13 N1 1.47(8) . ?
C13 C14 1.55(2) . ?
C13 H13A 0.9700 . ?
C13 H13B 0.9700 . ?
C14 H14A 0.9600 . ?
C14 H14B 0.9600 . ?
C14 H14C 0.9600 . ?
C15 C16 1.56(8) . ?
C15 N1 1.57(7) . ?
C15 H15A 0.9700 . ?
C15 H15B 0.9700 . ?
C16 H16A 0.9600 . ?
C16 H16B 0.9600 . ?
C16 H16C 0.9600 . ?
C17 C18 1.53(2) . ?
C17 N2 1.53(2) . ?
C17 H17A 0.9700 . ?
C17 H17B 0.9700 . ?
C18 H18A 0.9600 . ?
C18 H18B 0.9600 . ?
C18 H18C 0.9600 . ?
C19 N2 1.49(7) . ?
C19 C20 1.54(2) . ?
C19 H19A 0.9700 . ?
C19 H19B 0.9700 . ?
C20 H20A 0.9600 . ?
C20 H20B 0.9600 . ?
C20 H20C 0.9600 . ?
C21 N2 1.53(12) . ?
C21 C22 1.58(12) . ?
C21 H21A 0.9700 . ?
C21 H21B 0.9700 . ?
C22 H22A 0.9600 . ?
C22 H22B 0.9600 . ?
C22 H22C 0.9600 . ?
C23 C24 1.37(8) . ?
C23 N2 1.46(10) . ?
```

```
C23 H23A 0.9700 . ?
C23 H23B 0.9700 . ?
C24 H24A 0.9600 . ?
C24 H24B 0.9600 . ?
C24 H24C 0.9600 . ?
C25 C26 1.54(2) . ?
C25 N3 1.54(2) . ?
C25 C27 1.86(6) 3_556 ?
C25 H25A 0.9700 . ?
C25 H25B 0.9700 . ?
C25A C26A 1.54(3) . ?
C25A N3 1.88(14) . ?
C25A H25C 0.9700 . ?
C25A H25D 0.9700 . ?
C26 H26A 0.9600 . ?
C26 H26B 0.9600 . ?
C26 H26C 0.9600 . ?
C26A H26D 0.9600 . ?
C26A H26E 0.9600 . ?
C26A H26F 0.9600 . ?
C27 C28 1.54(2) . ?
C27 N3 1.54(2) . ?
C27 C25 1.86(6) 3_556 ?
C27 H27A 0.9700 . ?
C27 H27B 0.9700 . ?
C28 H28A 0.9600 . ?
C28 H28B 0.9600 . ?
C28 H28C 0.9600 . ?
C29 N4 1.54(2) . ?
C29 C30 1.54(2) . ?
C29 H29A 0.9700 . ?
C29 H29B 0.9700 . ?
C30 H30A 0.9600 . ?
C30 H30B 0.9600 . ?
C30 H30C 0.9600 . ?
C31 C32 1.54(2) . ?
C31 N4 1.54(2) . ?
C31 H31A 0.9700 . ?
C31 H31B 0.9700 . ?
C31A N4 1.54(2) . ?
C31A C32A 1.54(2) . ?
C31A H31C 0.9700 . ?
C31A H31D 0.9700 . ?
C32 H32A 0.9600 . ?
C32 H32B 0.9600 . ?
C32 H32C 0.9600 . ?
C32A H32D 0.9600 . ?
C32A H32E 0.9600 . ?
C32A H32F 0.9600 . ?
N3 C25 1.54(2) 3_556 ?
N3 C27 1.54(2) 3_556 ?
N3 C25A 1.88(14) 3_556 ?
N4 C29 1.54(2) 3_665 ?
N4 C31A 1.54(2) 3_665 ?
N4 C31 1.54(2) 3_665 ?
O1 W1 1.66(3) . ?
O2 W2 1.89(3) 2_655 ?
O2 W1 1.93(3) . ?
O3 W2 1.87(3) . ?
O3 W1 1.92(3) . ?
O4 W2 1.69(3) . ?
O5 W3 1.94(3) . ?
O5 W1 1.94(3) . ?
O6 W4 1.89(3) . ?
O6 W1 1.97(3) . ?
O7 W5 1.87(3) . ?
```

```
O7 W2 1.99(3) . ?
O8 Si2 1.62(3) . ?
O8 W1 2.32(3) . ?
O8 W2 2.34(3) 2_655 ?
O8 W3 2.37(3) . ?
O9 W3 1.85(3) . ?
O9 W2 1.99(3) 2_655 ?
O10 W3 1.69(4) . ?
O11 W4 1.88(3) . ?
O11 W3 1.94(3) . ?
O12 W4 1.71(4) . ?
O13 W4 1.91(3) . ?
O13 W5 1.94(3) . ?
O14 W5 1.72(3) . ?
O15 W3 1.87(3) 2_655 ?
O15 W5 1.98(3) . ?
O16 Si2 1.62(3) . ?
O16 W5 2.23(3) . ?
O16 W4 2.22(3) . ?
O17 P1 1.58(4) . ?
O17 W4 2.00(3) . ?
O18 P1 1.53(3) . ?
O18 W5 2.03(3) . ?
O19 P1 1.53(3) . ?
O22 W6 1.71(3) . ?
O23 W7 1.89(4) . ?
O23 W6 1.92(4) . ?
O24 W7 1.69(4) . ?
O25 W6 1.93(3) 2 ?
O25 W7 1.97(3) . ?
O26 W8 1.90(3) . ?
O26 W6 1.93(3) . ?
O27 W9 1.91(3) . ?
O27 W7 1.96(3) . ?
O28 W7 1.93(4) . ?
O28 W10 1.99(3) . ?
O29 W6 1.94(3) 2 ?
O29 W10 1.94(3) . ?
O30 Si1 1.64(4) . ?
O30 W6 2.26(3) 2 ?
O30 W7 2.35(3) . ?
O30 W10 2.39(4) . ?
O31 W10 1.70(4) . ?
O32 W9 1.90(3) . ?
O32 W10 1.94(3) . ?
O33 W9 1.72(4) . ?
O34 W9 1.90(3) . ?
O34 W8 1.92(3) . ?
O35 W8 1.67(4) . ?
O36 W10 1.92(3) 2 ?
O36 W8 1.93(3) . ?
O37 Si1 1.58(4) . ?
O37 W9 2.26(4) . ?
O37 W8 2.30(4) . ?
O38 P2 1.57(4) . ?
O38 W9 2.04(3) . ?
O39 P2 1.59(4) . ?
O39 W8 1.99(3) . ?
O40 P2 1.47(4) . ?
Si1 O37 1.58(4) 2 ?
Si1 O30 1.64(4) 2 ?
Si2 O8 1.62(3) 2_655 ?
Si2 O16 1.62(3) 2_655 ?
W2 O2 1.89(3) 2_655 ?
W2 O9 1.99(3) 2_655 ?
W2 O8 2.34(3) 2_655 ?
```

```
W3 O15 1.87(3) 2_655 ?
W6 O25 1.93(3) 2 ?
W6 O29 1.94(3) 2 ?
W6 O30 2.26(3) 2 ?
W10 O36 1.92(3) 2 ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 P1 111(3) . . ?
C2 C1 H1A 109.7 . . ?
P1 C1 H1A 109.7 . . ?
C2 C1 H1B 109.2 . . ?
P1 C1 H1B 109.4 . . ?
H1A C1 H1B 108.1 . . ?
N1S C1S C2S 168(9) . . ?
C3 C2 C1 109(4) . . ?
C3 C2 H2A 109.9 . . ?
C1 C2 H2A 110.0 . . ?
C3 C2 H2B 110.0 . . ?
C1 C2 H2B 109.6 . . ?
H2A C2 H2B 108.3 . . ?
C1S C2S H2S1 108.9 . . ?
C1S C2S H2S2 110.2 . . ?
H2S1 C2S H2S2 109.4 . . ?
C1S C2S H2S3 109.3 . . ?
H2S1 C2S H2S3 109.5 . . ?
H2S2 C2S H2S3 109.5 . . ?
O21 C3 O20 122(5) . . ?
O21 C3 C2 123(5) . . ?
O20 C3 C2 113(4) . . ?
C4S C3S N2S 176(10) . . ?
C5 C4 P2 114(4) . . ?
C5 C4 H4A 108.5 . . ?
P2 C4 H4A 108.4 . . ?
C5 C4 H4B 109.2 . . ?
P2 C4 H4B 109.0 . . ?
H4A C4 H4B 107.6 . . ?
C3S C4S H4S1 109.4 . . ?
C3S C4S H4S2 109.6 . . ?
H4S1 C4S H4S2 109.5 . . ?
C3S C4S H4S3 109.4 . . ?
H4S1 C4S H4S3 109.5 . . ?
H4S2 C4S H4S3 109.5 . . ?
C6 C5 C4 115(6) . . ?
C6 C5 H5A 108.4 . . ?
C4 C5 H5A 108.3 . . ?
C6 C5 H5B 108.4 . . ?
C4 C5 H5B 108.9 . . ?
H5A C5 H5B 107.4 . . ?
N3S C5S C6S 171(9) . . ?
O42 C6 O41 125(10) . . ?
O42 C6 C5 120(10) . . ?
O41 C6 C5 115(8) . . ?
C5S C6S H6S1 109.8 . . ?
C5S C6S H6S2 108.7 . . ?
H6S1 C6S H6S2 109.5 . . ?
C5S C6S H6S3 109.9 . . ?
H6S1 C6S H6S3 109.5 . . ?
H6S2 C6S H6S3 109.4 . . ?
C8S C7S H7S1 109.4 . . ?
```

```
C8S C7S H7S2 109.8 . . ?
H7S1 C7S H7S2 109.3 . . ?
C8S C7S H7S3 109.7 . . ?
H7S1 C7S H7S3 109.3 . . ?
H7S2 C7S H7S3 109.3 . . ?
N4S C8S C7S 170(10) . . ?
C10 C9 N1 118(7) . . ?
C10 C9 H9A 107.5 . . ?
N1 C9 H9A 107.8 . . ?
C10 C9 H9B 108.1 . . ?
N1 C9 H9B 107.6 . . ?
H9A C9 H9B 107.1 . . ?
N5S C9S C10S 167(7) . . ?
C9 C10 H10A 109.4 . . ?
C9 C10 H10B 109.8 . . ?
H10A C10 H10B 109.5 . . ?
C9 C10 H10C 109.2 . . ?
H10A C10 H10C 109.5 . . ?
H10B C10 H10C 109.5 . . ?
C9S C10S H10D 109.6 . . ?
C9S C10S H10E 109.2 . . ?
H10D C10S H10E 109.5 . . ?
C9S C10S H10F 109.6 . . ?
H10D C10S H10F 109.5 . . ?
H10E C10S H10F 109.5 . . ?
N1 C11 C12 114(5) . . ?
N1 C11 H11A 108.8 . . ?
C12 C11 H11A 108.9 . . ?
N1 C11 H11B 108.5 . . ?
C12 C11 H11B 108.6 . . ?
H11A C11 H11B 107.6 . . ?
N6S C11S C12S 163(10) . . ?
C11 C12 H12A 109.3 . . ?
C11 C12 H12B 109.7 . . ?
H12A C12 H12B 109.5 . . ?
C11 C12 H12C 109.4 . . ?
H12A C12 H12C 109.5 . . ?
H12B C12 H12C 109.5 . . ?
C11S C12S H12D 109.4 . . ?
C11S C12S H12E 109.7 . . ?
H12D C12S H12E 109.4 . . ?
C11S C12S H12F 109.5 . . ?
H12D C12S H12F 109.4 . . ?
H12E C12S H12F 109.4 . . ?
N1 C13 C14 113(5) . . ?
N1 C13 H13A 109.7 . . ?
C14 C13 H13A 109.2 . . ?
N1 C13 H13B 108.6 . . ?
C14 C13 H13B 108.3 . . ?
H13A C13 H13B 107.8 . . ?
C13 C14 H14A 109.9 . . ?
C13 C14 H14B 109.7 . . ?
H14A C14 H14B 109.5 . . ?
C13 C14 H14C 108.8 . . ?
H14A C14 H14C 109.5 . . ?
H14B C14 H14C 109.5 . . ?
C16 C15 N1 110(5) . . ?
C16 C15 H15A 109.5 . . ?
N1 C15 H15A 109.8 . . ?
C16 C15 H15B 110.0 . . ?
N1 C15 H15B 109.6 . . ?
H15A C15 H15B 108.2 . . ?
C15 C16 H16A 109.5 . . ?
C15 C16 H16B 109.7 . . ?
H16A C16 H16B 109.5 . . ?
C15 C16 H16C 109.1 . . ?
```

```
H16A C16 H16C 109.5 . . ?
H16B C16 H16C 109.5 . . ?
C18 C17 N2 113(5) . . ?
C18 C17 H17A 109.1 . . ?
N2 C17 H17A 109.0 . . ?
C18 C17 H17B 108.6 . . ?
N2 C17 H17B 109.1 . . ?
H17A C17 H17B 107.7 . . ?
C17 C18 H18A 109.5 . . ?
C17 C18 H18B 109.2 . . ?
H18A C18 H18B 109.5 . . ?
C17 C18 H18C 109.7 . . ?
H18A C18 H18C 109.5 . . ?
H18B C18 H18C 109.5 . . ?
N2 C19 C20 115(6) . . ?
N2 C19 H19A 107.9 . . ?
C20 C19 H19A 108.3 . . ?
N2 C19 H19B 108.8 . . ?
C20 C19 H19B 109.2 . . ?
H19A C19 H19B 107.5 . . ?
C19 C20 H20A 109.1 . . ?
C19 C20 H20B 109.2 . . ?
H20A C20 H20B 109.5 . . ?
C19 C20 H20C 110.1 . . ?
H20A C20 H20C 109.5 . . ?
H20B C20 H20C 109.5 . . ?
N2 C21 C22 106(8) . . ?
N2 C21 H21A 110.8 . . ?
C22 C21 H21A 110.1 . . ?
N2 C21 H21B 110.5 . . ?
C22 C21 H21B 110.8 . . ?
H21A C21 H21B 108.7 . . ?
C21 C22 H22A 109.6 . . ?
C21 C22 H22B 109.1 . . ?
H22A C22 H22B 109.5 . . ?
C21 C22 H22C 109.8 . . ?
H22A C22 H22C 109.5 . . ?
H22B C22 H22C 109.5 . . ?
C24 C23 N2 125(7) . . ?
C24 C23 H23A 106.4 . . ?
N2 C23 H23A 106.5 . . ?
C24 C23 H23B 105.7 . . ?
N2 C23 H23B 106.0 . . ?
H23A C23 H23B 106.4 . . ?
C23 C24 H24A 109.7 . . ?
C23 C24 H24B 108.9 . . ?
H24A C24 H24B 109.5 . . ?
C23 C24 H24C 109.8 . . ?
H24A C24 H24C 109.5 . . ?
H24B C24 H24C 109.5 . . ?
C26 C25 N3 109(2) . . ?
C26 C25 C27 110(10) . 3_556 ?
N3 C25 C27 52.9(14) . 3_556 ?
C26 C25 H25A 109.8 . . ?
N3 C25 H25A 109.8 . . ?
C27 C25 H25A 59.7 3_556 . ?
C26 C25 H25B 110.1 . . ?
N3 C25 H25B 110.0 . . ?
C27 C25 H25B 140.1 3_556 . ?
H25A C25 H25B 108.3 . . ?
C26A C25A N3 92(6) . . ?
C26A C25A H25C 114.4 . . ?
N3 C25A H25C 113.5 . . ?
C26A C25A H25D 111.8 . . ?
N3 C25A H25D 113.4 . . ?
H25C C25A H25D 110.6 . . ?
```

```
C25 C26 H26A 109.4 . . ?
C25 C26 H26B 109.6 . . ?
H26A C26 H26B 109.5 . . ?
C25 C26 H26C 109.3 . . ?
H26A C26 H26C 109.5 . . ?
H26B C26 H26C 109.5 . . ?
C25A C26A H26D 110.1 . . ?
C25A C26A H26E 107.9 . . ?
H26D C26A H26E 109.5 . . ?
C25A C26A H26F 110.4 . . ?
H26D C26A H26F 109.5 . . ?
H26E C26A H26F 109.5 . . ?
C28 C27 N3 107(2) . . ?
C28 C27 C25 132(10) . 3_556 ?
N3 C27 C25 52.9(14) . 3_556 ?
C28 C27 H27A 110.5 . . ?
N3 C27 H27A 110.4 . . ?
C25 C27 H27A 58.3 3_556 . ?
C28 C27 H27B 110.1 . . ?
N3 C27 H27B 110.2 . . ?
C25 C27 H27B 117.9 3_556 . ?
H27A C27 H27B 108.5 . . ?
C27 C28 H28A 109.5 . . ?
C27 C28 H28B 109.2 . . ?
H28A C28 H28B 109.5 . . ?
C27 C28 H28C 109.7 . . ?
H28A C28 H28C 109.5 . . ?
H28B C28 H28C 109.5 . . ?
N4 C29 C30 108(2) . . ?
N4 C29 H29A 110.2 . . ?
C30 C29 H29A 110.3 . . ?
N4 C29 H29B 110.1 . . ?
C30 C29 H29B 110.2 . . ?
H29A C29 H29B 108.5 . . ?
C29 C30 H30A 109.5 . . ?
C29 C30 H30B 109.5 . . ?
H30A C30 H30B 109.5 . . ?
C29 C30 H30C 109.4 . . ?
H30A C30 H30C 109.5 . . ?
H30B C30 H30C 109.5 . . ?
C32 C31 N4 106(2) . . ?
C32 C31 H31A 110.4 . . ?
N4 C31 H31A 110.3 . . ?
C32 C31 H31B 110.5 . . ?
N4 C31 H31B 110.4 . . ?
H31A C31 H31B 108.6 . . ?
N4 C31A C32A 107(7) . . ?
N4 C31A H31C 110.4 . . ?
C32A C31A H31C 110.4 . . ?
N4 C31A H31D 110.2 . . ?
C32A C31A H31D 110.1 . . ?
H31C C31A H31D 108.6 . . ?
C31 C32 H32A 109.5 . . ?
C31 C32 H32B 109.6 . . ?
H32A C32 H32B 109.5 . . ?
C31 C32 H32C 109.4 . . ?
H32A C32 H32C 109.5 . . ?
H32B C32 H32C 109.5 . . ?
C31A C32A H32D 109.8 . . ?
C31A C32A H32E 109.5 . . ?
H32D C32A H32E 109.5 . . ?
C31A C32A H32F 109.2 . . ?
H32D C32A H32F 109.5 . . ?
H32E C32A H32F 109.5 . . ?
C13 N1 C11 110(5) . . ?
C13 N1 C9 113(5) . . ?
```

```
C11 N1 C9 103(5) . . ?
C13 N1 C15 107(5) . . ?
C11 N1 C15 112(4) . . ?
C9 N1 C15 112(5) . . ?
C23 N2 C19 103(5) . . ?
C23 N2 C21 116(6) . . ?
C19 N2 C21 100(6) . . ?
C23 N2 C17 117(6) . . ?
C19 N2 C17 106(5) . . ?
C21 N2 C17 111(6) . . ?
C25 N3 C25 180(4) . 3_556 ?
C25 N3 C27 74(2) . 3_556 ?
C25 N3 C27 106(2) 3_556 3_556 ?
C25 N3 C27 106(2) . . ?
C25 N3 C27 74(2) 3_556 . ?
C27 N3 C27 180(10) 3_556 . ?
C25 N3 C25A 97(7) . . ?
C25 N3 C25A 83(7) 3_556 . ?
C27 N3 C25A 88(5) 3_556 . ?
C27 N3 C25A 92(5) . . ?
C25 N3 C25A 83(7) . 3_556 ?
C25 N3 C25A 97(7) 3_556 3_556 ?
C27 N3 C25A 92(5) 3_556 3_556 ?
C27 N3 C25A 88(5) . 3_556 ?
C25A N3 C25A 180.00(5) . 3_556 ?
C29 N4 C29 180(8) . 3_665 ?
C29 N4 C31A 80(6) . . ?
C29 N4 C31A 100(6) 3_665 . ?
C29 N4 C31A 100(6) . 3_665 ?
C29 N4 C31A 80(6) 3_665 3_665 ?
C31A N4 C31A 180(10) . 3_665 ?
C29 N4 C31 73(2) . 3_665 ?
C29 N4 C31 107(2) 3_665 3_665 ?
C31A N4 C31 88(5) . 3_665 ?
C31A N4 C31 92(5) 3_665 3_665 ?
C29 N4 C31 107(2) . . ?
C29 N4 C31 73(2) 3_665 . ?
C31A N4 C31 92(5) . . ?
C31A N4 C31 88(5) 3_665 . ?
C31 N4 C31 180(8) 3_665 . ?
W2 O2 W1 122.2(17) 2_655 . ?
W2 O3 W1 163.8(15) . . ?
W3 O5 W1 118.6(16) . . ?
W4 O6 W1 142.1(16) . . ?
W5 O7 W2 143.3(17) . . ?
Si2 O8 W1 127.0(17) . . ?
Si2 O8 W2 123.5(17) . 2_655 ?
W1 O8 W2 91.8(10) . 2_655 ?
Si2 O8 W3 123.6(16) . . ?
W1 O8 W3 90.6(11) . . ?
W2 O8 W3 90.0(11) 2_655 . ?
W3 O9 W2 120.2(16) . 2_655 ?
W4 O11 W3 143.5(16) . . ?
W4 O13 W5 116.6(15) . . ?
W3 O15 W5 139.7(17) 2_655 . ?
Si2 O16 W5 128.0(17) . . ?
Si2 O16 W4 127.5(17) . . ?
W5 O16 W4 94.8(11) . . ?
P1 O17 W4 136(2) . . ?
P1 O18 W5 137(2) . . ?
W7 O23 W6 163.7(18) . . ?
W6 O25 W7 118.2(15) 2 . ?
W8 O26 W6 145(2) . . ?
W9 O27 W7 142.2(17) . . ?
W7 O28 W10 117.0(18) . . ?
W6 O29 W10 117.9(17) 2 . ?
```

Si1 O30 W6 127.7(19) . 2 ?
Si1 O30 W7 124.1(19) . . ?
W6 O30 W7 93.1(12) 2 . ?
Si1 O30 W10 121.1(18) . . ?
W6 O30 W10 91.2(13) 2 . ?
W7 O30 W10 89.3(12) . . ?
W9 O32 W10 141.6(17) . . ?
W9 O34 W8 117.9(16) . . ?
W10 O36 W8 139.8(18) 2 . ?
Si1 O37 W9 127(2) . . ?
Si1 O37 W8 126(2) . . ?
W9 O37 W8 91.7(13) . . ?
P2 O38 W9 134(2) . . ?
P2 O39 W8 137(2) . . ?
O19 P1 O18 112(2) . . ?
O19 P1 O17 114(2) . . ?
O18 P1 O17 108.2(18) . . ?
O19 P1 C1 106.7(19) . . ?
O18 P1 C1 108(2) . . ?
O17 P1 C1 108(2) . . ?
O40 P2 O38 112(2) . . ?
O40 P2 O39 114(2) . . ?
O38 P2 O39 109.2(19) . . ?
O40 P2 C4 108(2) . . ?
O38 P2 C4 107(3) . . ?
O39 P2 C4 106(3) . . ?
O37 Si1 O37 112(3) . 2 ?
O37 Si1 O30 110.8(18) . . ?
O37 Si1 O30 108.8(18) 2 . ?
O37 Si1 O30 108.8(18) . 2 ?
O37 Si1 O30 110.8(18) 2 2 ?
O30 Si1 O30 106(3) . 2 ?
O8 Si2 O8 109(2) 2_655 . ?
O8 Si2 O16 106.4(15) 2_655 2_655 ?
O8 Si2 O16 108.3(16) . 2_655 ?
O8 Si2 O16 108.3(16) 2_655 . ?
O8 Si2 O16 106.4(15) . . ?
O16 Si2 O16 118(2) 2_655 . ?
O1 W1 O3 101.2(14) . . ?
O1 W1 O2 103.4(14) . . ?
O3 W1 O2 89.9(14) . . ?
O1 W1 O5 101.6(15) . . ?
O3 W1 O5 156.0(11) . . ?
O2 W1 O5 92.1(13) . . ?
O1 W1 O6 102.0(13) . . ?
O3 W1 O6 85.7(13) . . ?
O2 W1 O6 154.5(13) . . ?
O5 W1 O6 82.3(13) . . ?
O1 W1 O8 174.9(13) . . ?
O3 W1 O8 81.8(11) . . ?
O2 W1 O8 72.3(12) . . ?
O5 W1 O8 76.1(12) . . ?
O6 W1 O8 82.2(12) . . ?
O4 W2 O3 100.8(14) . . ?
O4 W2 O2 102.8(14) . 2_655 ?
O3 W2 O2 91.6(14) . 2_655 ?
O4 W2 O9 102.1(14) . 2_655 ?
O3 W2 O9 156.2(11) . 2_655 ?
O2 W2 O9 89.4(13) 2_655 2_655 ?
O4 W2 O7 100.3(13) . . ?
O3 W2 O7 88.6(13) . . ?
O2 W2 O7 156.4(13) 2_655 . ?
O9 W2 O7 81.3(12) 2_655 . ?
O4 W2 O8 173.7(15) . 2_655 ?
O3 W2 O8 83.7(11) . 2_655 ?
O2 W2 O8 72.5(12) 2_655 2_655 ?

```
O9 W2 O8 74.0(11) 2_655 2_655 ?
O7 W2 O8 84.1(11) . 2_655 ?
O10 W3 O9 100.5(15) . . ?
O10 W3 O15 100.2(15) . 2_655 ?
O9 W3 O15 89.3(13) . 2_655 ?
O10 W3 O5 100.8(15) . . ?
O9 W3 O5 84.6(11) . . ?
O15 W3 O5 158.9(14) 2_655 . ?
O10 W3 O11 103.6(14) . . ?
O9 W3 O11 155.1(13) . . ?
O15 W3 O11 92.3(13) 2_655 . ?
O5 W3 O11 85.1(12) . . ?
O10 W3 O8 174.2(13) . . ?
O9 W3 O8 75.6(12) . . ?
O15 W3 O8 84.1(12) 2_655 . ?
O5 W3 O8 74.8(12) . . ?
O11 W3 O8 79.9(12) . . ?
O12 W4 O11 103.8(15) . . ?
O12 W4 O6 101.2(15) . . ?
O11 W4 O6 91.4(12) . . ?
O12 W4 O13 96.3(15) . . ?
O11 W4 O13 159.6(13) . . ?
O6 W4 O13 88.0(13) . . ?
O12 W4 O17 94.0(14) . . ?
O11 W4 O17 89.3(12) . . ?
O6 W4 O17 164.2(14) . . ?
O13 W4 O17 85.9(13) . . ?
O12 W4 O16 169.4(14) . . ?
O11 W4 O16 85.2(12) . . ?
O6 W4 O16 84.1(12) . . ?
O13 W4 O16 74.5(12) . . ?
O17 W4 O16 80.3(12) . . ?
O14 W5 O7 98.9(14) . . ?
O14 W5 O13 97.0(15) . . ?
O7 W5 O13 89.7(13) . . ?
O14 W5 O15 102.8(15) . . ?
O7 W5 O15 90.7(13) . . ?
O13 W5 O15 159.8(13) . . ?
O14 W5 O18 98.1(14) . . ?
O7 W5 O18 163.0(13) . . ?
O13 W5 O18 87.1(13) . . ?
O15 W5 O18 86.6(13) . . ?
O14 W5 O16 170.1(14) . . ?
O7 W5 O16 85.3(12) . . ?
O13 W5 O16 73.9(12) . . ?
O15 W5 O16 86.0(12) . . ?
O18 W5 O16 77.8(11) . . ?
O22 W6 O23 102.2(15) . . ?
O22 W6 O26 101.8(14) . . ?
O23 W6 O26 87.1(15) . . ?
O22 W6 O25 99.8(14) . 2 ?
O23 W6 O25 93.3(14) . 2 ?
O26 W6 O25 157.9(13) . 2 ?
O22 W6 O29 98.4(15) . 2 ?
O23 W6 O29 158.0(13) . 2 ?
O26 W6 O29 81.1(14) . 2 ?
O25 W6 O29 90.9(14) 2 2 ?
O22 W6 O30 172.9(16) . 2 ?
O23 W6 O30 83.3(13) . 2 ?
O26 W6 O30 83.0(13) . 2 ?
O25 W6 O30 75.1(12) 2 2 ?
O29 W6 O30 77.0(13) 2 2 ?
O24 W7 O23 100.9(16) . . ?
O24 W7 O28 99.8(17) . . ?
O23 W7 O28 158.0(13) . . ?
O24 W7 O27 101.6(15) . . ?
```

```
O23 W7 O27 85.5(14) . . ?
O28 W7 O27 83.1(14) . . ?
O24 W7 O25 101.0(15) . . ?
O23 W7 O25 92.1(14) . . ?
O28 W7 O25 91.2(14) . . ?
O27 W7 O25 157.3(13) . . ?
O24 W7 O30 172.8(14) . . ?
O23 W7 O30 82.5(13) . . ?
O28 W7 O30 77.8(13) . . ?
O27 W7 O30 84.9(13) . . ?
O25 W7 O30 72.4(12) . . ?
O35 W8 O26 101.3(16) . . ?
O35 W8 O34 101.4(16) . . ?
O26 W8 O34 93.0(14) . . ?
O35 W8 O36 100.1(16) . . ?
O26 W8 O36 90.4(14) . . ?
O34 W8 O36 157.1(14) . . ?
O35 W8 O39 95.2(16) . . ?
O26 W8 O39 163.4(14) . . ?
O34 W8 O39 84.9(14) . . ?
O36 W8 O39 85.5(14) . . ?
O35 W8 O37 171.9(15) . . ?
O26 W8 O37 86.0(14) . . ?
O34 W8 O37 74.6(13) . . ?
O36 W8 O37 83.1(13) . . ?
O39 W8 O37 77.5(13) . . ?
O33 W9 O27 100.2(15) . . ?
O33 W9 O32 100.4(15) . . ?
O27 W9 O32 91.2(13) . . ?
O33 W9 O34 98.9(15) . . ?
O27 W9 O34 91.4(14) . . ?
O32 W9 O34 159.8(14) . . ?
O33 W9 O38 94.2(14) . . ?
O27 W9 O38 165.5(14) . . ?
O32 W9 O38 87.6(13) . . ?
O34 W9 O38 84.8(13) . . ?
O33 W9 O37 171.4(15) . . ?
O27 W9 O37 86.7(13) . . ?
O32 W9 O37 84.4(13) . . ?
O34 W9 O37 75.8(14) . . ?
O38 W9 O37 78.7(13) . . ?
O31 W10 O36 103.8(16) . 2 ?
O31 W10 O32 101.2(15) . . ?
O36 W10 O32 91.1(13) 2 . ?
O31 W10 O29 101.2(15) . . ?
O36 W10 O29 89.3(13) 2 . ?
O32 W10 O29 156.8(14) . . ?
O31 W10 O28 98.6(15) . . ?
O36 W10 O28 157.4(15) 2 . ?
O32 W10 O28 87.1(13) . . ?
O29 W10 O28 83.7(13) . . ?
O31 W10 O30 172.6(14) . . ?
O36 W10 O30 81.8(13) 2 . ?
O32 W10 O30 83.3(13) . . ?
O29 W10 O30 73.8(13) . . ?
O28 W10 O30 75.6(13) . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
```

```
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
P1 C1 C2 C3 -171(4) . . . . ?
C1 C2 C3 O21 30(9) . . . . ?
C1 C2 C3 O20 -165(5) . . . . ?
P2 C4 C5 C6 -172(6) . . . . ?
C4 C5 C6 O42 31(14) . . . . ?
C4 C5 C6 O41 -160(7) . . . . ?
C14 C13 N1 C11 175(5) . . . . ?
C14 C13 N1 C9 61(8) . . . . ?
C14 C13 N1 C15 -63(7) . . . . ?
C12 C11 N1 C13 65(8) . . . . ?
C12 C11 N1 C9 -175(6) . . . . ?
C12 C11 N1 C15 -54(8) . . . . ?
C10 C9 N1 C13 49(10) . . . . ?
C10 C9 N1 C11 -70(9) . . . . ?
C10 C9 N1 C15 170(7) . . . . ?
C16 C15 N1 C13 -173(5) . . . . ?
C16 C15 N1 C11 -53(7) . . . . ?
C16 C15 N1 C9 63(7) . . . . ?
C24 C23 N2 C19 74(10) . . . . ?
C24 C23 N2 C21 -35(12) . . . . ?
C24 C23 N2 C17 -170(8) . . . . ?
C20 C19 N2 C23 178(6) . . . . ?
C20 C19 N2 C21 -62(8) . . . . ?
C20 C19 N2 C17 54(8) . . . . ?
C22 C21 N2 C23 -66(10) . . . . ?
C22 C21 N2 C19 -177(7) . . . . ?
C22 C21 N2 C17 71(9) . . . . ?
C18 C17 N2 C23 -55(10) . . . . ?
C18 C17 N2 C19 60(8) . . . . ?
C18 C17 N2 C21 168(7) . . . . ?
C26 C25 N3 C25 32(84) . . . 3_556 ?
C27 C25 N3 C25 133(84) 3_556 . . 3_556 ?
C26 C25 N3 C27 -101(15) . . . 3_556 ?
C26 C25 N3 C27 79(15) . . . . ?
C27 C25 N3 C27 180.00(3) 3_556 . . . ?
C26 C25 N3 C25A -15(13) . . . . ?
C27 C25 N3 C25A 86(6) 3_556 . . . ?
C26 C25 N3 C25A 165(13) . . . 3_556 ?
C27 C25 N3 C25A -94(6) 3_556 . . 3_556 ?
C28 C27 N3 C25 50(15) . . . . ?
C25 C27 N3 C25 180.00(2) 3_556 . . . ?
C28 C27 N3 C25 -130(15) . . . 3_556 ?
C28 C27 N3 C27 146(76) . . . 3_556 ?
C25 C27 N3 C27 -84(73) 3_556 . . 3_556 ?
C28 C27 N3 C25A 148(14) . . . . ?
C25 C27 N3 C25A -82(7) 3_556 . . . ?
C28 C27 N3 C25A -32(14) . . . 3_556 ?
C25 C27 N3 C25A 98(7) 3_556 . . 3_556 ?
C26A C25A N3 C25 7(38) . . . . ?
C26A C25A N3 C25 -173(38) . . . 3_556 ?
C26A C25A N3 C27 81(38) . . . 3_556 ?
C26A C25A N3 C27 -99(38) . . . . ?
C26A C25A N3 C25A -100(100) . . . 3_556 ?
C30 C29 N4 C29 62(9) . . . 3_665 ?
C30 C29 N4 C31A -150(9) . . . . ?
C30 C29 N4 C31A 30(9) . . . 3_665 ?
C30 C29 N4 C31 119(10) . . . 3_665 ?
C30 C29 N4 C31 -61(10) . . . . ?
C32A C31A N4 C29 84(10) . . . . ?
C32A C31A N4 C29 -96(10) . . . 3_665 ?
C32A C31A N4 C31A -102(100) . . . 3_665 ?
C32A C31A N4 C31 157(10) . . . 3_665 ?
C32A C31A N4 C31 -23(10) . . . . ?
C32 C31 N4 C29 -57(10) . . . . ?
```

```
C32 C31 N4 C29 123(10) . . . 3_665 ?
C32 C31 N4 C31A 23(10) . . . . ?
C32 C31 N4 C31A -157(10) . . . 3_665 ?
C32 C31 N4 C31 0(100) . . . 3_665 ?
W5 O18 P1 O19 135(3) . . . . ?
W5 O18 P1 O17 8(3) . . . . ?
W5 O18 P1 C1 -108(3) . . . . ?
W4 O17 P1 O19 -127(3) . . . . ?
W4 O17 P1 O18 -2(3) . . . . ?
W4 O17 P1 C1 115(3) . . . . ?
C2 C1 P1 O19 175(4) . . . . ?
C2 C1 P1 O18 54(5) . . . . ?
C2 C1 P1 O17 -63(4) . . . . ?
W9 O38 P2 O40 -129(3) . . . . ?
W9 O38 P2 O39 -1(3) . . . . ?
W9 O38 P2 C4 113(3) . . . . ?
W8 O39 P2 O40 130(3) . . . . ?
W8 O39 P2 O38 3(3) . . . . ?
W8 O39 P2 C4 -112(3) . . . . ?
C5 C4 P2 O40 171(5) . . . . ?
C5 C4 P2 O38 -68(6) . . . . ?
C5 C4 P2 O39 49(6) . . . . ?
W9 O37 Si1 O37 -117(3) . . . 2 ?
W8 O37 Si1 O37 116(3) . . . 2 ?
W9 O37 Si1 O30 4(3) . . . . ?
W8 O37 Si1 O30 -122(2) . . . . ?
W9 O37 Si1 O30 120(2) . . . 2 ?
W8 O37 Si1 O30 -7(3) . . . 2 ?
W6 O30 Si1 O37 -179(2) 2 . . . ?
W7 O30 Si1 O37 54(3) . . . . ?
W10 O30 Si1 O37 -59(3) . . . . ?
W6 O30 Si1 O37 -56(3) 2 . . 2 ?
W7 O30 Si1 O37 177(2) . . . 2 ?
W10 O30 Si1 O37 64(3) . . . 2 ?
W6 O30 Si1 O30 63.4(18) 2 . . 2 ?
W7 O30 Si1 O30 -63.8(16) . . . 2 ?
W10 O30 Si1 O30 -177(3) . . . 2 ?
W1 O8 Si2 O8 -61.9(16) . . . 2_655 ?
W2 O8 Si2 O8 61.1(14) 2_655 . . 2_655 ?
W3 O8 Si2 O8 177(2) . . . 2_655 ?
W1 O8 Si2 O16 -177.1(18) . . . 2_655 ?
W2 O8 Si2 O16 -54(2) 2_655 . . 2_655 ?
W3 O8 Si2 O16 62(2) . . . 2_655 ?
W1 O8 Si2 O16 55(2) . . . . ?
W2 O8 Si2 O16 177.5(17) 2_655 . . . ?
W3 O8 Si2 O16 -67(2) . . . . ?
W5 O16 Si2 O8 -9(3) . . . 2_655 ?
W4 O16 Si2 O8 127.5(19) . . . 2_655 ?
W5 O16 Si2 O8 -126(2) . . . . ?
W4 O16 Si2 O8 11(2) . . . . ?
W5 O16 Si2 O16 112(2) . . . 2_655 ?
W4 O16 Si2 O16 -111(2) . . . 2_655 ?
W2 O3 W1 O1 150(6) . . . . ?
W2 O3 W1 O2 -106(6) . . . . ?
W2 O3 W1 O5 -11(8) . . . . ?
W2 O3 W1 O6 49(6) . . . . ?
W2 O3 W1 O8 -34(6) . . . . ?
W2 O2 W1 O1 -167(2) 2_655 . . . ?
W2 O2 W1 O3 92(2) 2_655 . . . ?
W2 O2 W1 O5 -64(2) 2_655 . . . ?
W2 O2 W1 O6 12(5) 2_655 . . . ?
W2 O2 W1 O8 10.2(19) 2_655 . . . ?
W3 O5 W1 O1 175.6(16) . . . . ?
W3 O5 W1 O3 -23(4) . . . . ?
W3 O5 W1 O2 71.4(17) . . . . ?
W3 O5 W1 O6 -83.6(16) . . . . ?
```

```
W3 O5 W1 O8 0.2(14) . . . . ?
W4 O6 W1 O1 147(3) . . . . ?
W4 O6 W1 O3 -112(3) . . . . ?
W4 O6 W1 O2 -32(5) . . . . ?
W4 O6 W1 O5 47(3) . . . . ?
W4 O6 W1 O8 -30(3) . . . . ?
Si2 O8 W1 O1 162(15) . . . . ?
W2 O8 W1 O1 27(16) 2_655 . . . ?
W3 O8 W1 O1 -63(16) . . . . ?
Si2 O8 W1 O3 36(2) . . . . ?
W2 O8 W1 O3 -99.5(12) 2_655 . . . ?
W3 O8 W1 O3 170.5(12) . . . . ?
Si2 O8 W1 O2 129(2) . . . . ?
W2 O8 W1 O2 -7.0(13) 2_655 . . . ?
W3 O8 W1 O2 -96.9(14) . . . . ?
Si2 O8 W1 O5 -135(2) . . . . ?
W2 O8 W1 O5 89.8(12) 2_655 . . . ?
W3 O8 W1 O5 -0.2(10) . . . . ?
Si2 O8 W1 O6 -51(2) . . . . ?
W2 O8 W1 O6 173.8(14) 2_655 . . . ?
W3 O8 W1 O6 83.8(12) . . . . ?
W1 O3 W2 O4 -150(6) . . . . ?
W1 O3 W2 O2 107(6) . . . 2_655 ?
W1 O3 W2 O9 15(8) . . . 2_655 ?
W1 O3 W2 O7 -49(6) . . . . ?
W1 O3 W2 O8 35(6) . . . 2_655 ?
W5 O7 W2 O4 -153(3) . . . . ?
W5 O7 W2 O3 106(3) . . . . ?
W5 O7 W2 O2 16(6) . . . 2_655 ?
W5 O7 W2 O9 -52(3) . . . 2_655 ?
W5 O7 W2 O8 22(3) . . . 2_655 ?
W2 O9 W3 O10 -179.8(17) 2_655 . . . ?
W2 O9 W3 O15 -79.5(17) 2_655 . . 2_655 ?
W2 O9 W3 O5 80.2(17) 2_655 . . . ?
W2 O9 W3 O11 14(4) 2_655 . . . ?
W2 O9 W3 O8 4.6(14) 2_655 . . . ?
W1 O5 W3 O10 -176.4(17) . . . . ?
W1 O5 W3 O9 -76.7(17) . . . . ?
W1 O5 W3 O15 -3(4) . . . 2_655 ?
W1 O5 W3 O11 80.6(16) . . . . ?
W1 O5 W3 O8 -0.2(14) . . . . ?
W4 O11 W3 O10 -135(3) . . . . ?
W4 O11 W3 O9 31(5) . . . . ?
W4 O11 W3 O15 124(3) . . . 2_655 ?
W4 O11 W3 O5 -35(3) . . . . ?
W4 O11 W3 O8 40(3) . . . . ?
Si2 O8 W3 O10 177(100) . . . . ?
W1 O8 W3 O10 40(13) . . . . ?
W2 O8 W3 O10 -52(13) 2_655 . . . ?
Si2 O8 W3 O9 -135(2) . . . . ?
W1 O8 W3 O9 88.4(11) . . . . ?
W2 O8 W3 O9 -3.4(11) 2_655 . . . ?
Si2 O8 W3 O15 -44.0(19) . . . 2_655 ?
W1 O8 W3 O15 179.2(13) . . . 2_655 ?
W2 O8 W3 O15 87.4(12) 2_655 . . 2_655 ?
Si2 O8 W3 O5 137(2) . . . . ?
W1 O8 W3 O5 0.2(10) . . . . ?
W2 O8 W3 O5 -91.6(11) 2_655 . . . ?
Si2 O8 W3 O11 49.4(19) . . . . ?
W1 O8 W3 O11 -87.4(12) . . . . ?
W2 O8 W3 O11 -179.2(12) 2_655 . . . ?
W3 O11 W4 O12 112(3) . . . . ?
W3 O11 W4 O6 11(3) . . . . ?
W3 O11 W4 O13 -77(5) . . . . ?
W3 O11 W4 O17 -154(3) . . . . ?
W3 O11 W4 O16 -73(3) . . . . ?
```

```
W1 O6 W4 O12 -123(3) . . . . ?
W1 O6 W4 O11 -18(3) . . . . ?
W1 O6 W4 O13 141(3) . . . . ?
W1 O6 W4 O17 74(6) . . . . ?
W1 O6 W4 O16 67(3) . . . . ?
W5 O13 W4 O12 170.0(18) . . . . ?
W5 O13 W4 O11 0(5) . . . . ?
W5 O13 W4 O6 -89.0(17) . . . . ?
W5 O13 W4 O17 76.5(17) . . . . ?
W5 O13 W4 O16 -4.6(13) . . . . ?
P1 O17 W4 O12 -129(3) . . . . ?
P1 O17 W4 O11 127(3) . . . . ?
P1 O17 W4 O6 34(6) . . . . ?
P1 O17 W4 O13 -33(3) . . . . ?
P1 O17 W4 O16 42(3) . . . . ?
Si2 O16 W4 O12 -174(6) . . . . ?
W5 O16 W4 O12 -27(8) . . . . ?
Si2 O16 W4 O11 38(2) . . . . ?
W5 O16 W4 O11 -174.9(12) . . . . ?
Si2 O16 W4 O6 -54(2) . . . . ?
W5 O16 W4 O6 93.2(12) . . . . ?
Si2 O16 W4 O13 -144(2) . . . . ?
W5 O16 W4 O13 3.6(11) . . . . ?
Si2 O16 W4 O17 128(2) . . . . ?
W5 O16 W4 O17 -84.8(12) . . . . ?
W2 O7 W5 O14 130(3) . . . . ?
W2 O7 W5 O13 -133(3) . . . . ?
W2 O7 W5 O15 27(3) . . . . ?
W2 O7 W5 O18 -54(7) . . . . ?
W2 O7 W5 O16 -59(3) . . . . ?
W4 O13 W5 O14 -171.3(17) . . . . ?
W4 O13 W5 O7 89.8(17) . . . . ?
W4 O13 W5 O15 -2(5) . . . . ?
W4 O13 W5 O18 -73.5(17) . . . . ?
W4 O13 W5 O16 4.6(13) . . . . ?
W3 O15 W5 O14 -114(3) 2_655 . . . ?
W3 O15 W5 O7 -14(3) 2_6̄55 . . . ?
W3 O15 W5 O13 77(5) 2_̄655 . . . ?
W3 O15 W5 O18 149(3) 2̄_655 . . . ?
W3 O15 W5 O16 71(3) 2_6̄55 . . . ?
P1 O18 W5 O14 120(3) . . . . ?
P1 O18 W5 O7 -57(6) . . . . ?
P1 O18 W5 O13 23(3) . . . . ?
P1 O18 W5 O15 -138(3) . . . . ?
P1 O18 W5 O16 -51(3) . . . . ?
Si2 O16 W5 O14 168(7) . . . . ?
W4 O16 W5 O14 21(8) . . . . ?
Si2 O16 W5 O7 52(2) . . . . ?
W4 O16 W5 O7 -94.6(12) . . . . ?
Si2 O16 W5 O13 144(2) . . . . ?
W4 O16 W5 O13 -3.5(10) . . . . ?
Si2 O16 W5 O15 -39(2) . . . . ?
W4 O16 W5 O15 174.3(12) . . . . ?
Si2 O16 W5 O18 -126(2) . . . . ?
W4 O16 W5 O18 87.0(12) . . . . ?
W7 O23 W6 O22 -161(7) . . . . ?
W7 O23 W6 O26 -59(7) . . . . ?
W7 O23 W6 O25 99(7) . . . 2 ?
W7 O23 W6 O29 -2(9) . . . 2 ?
W7 O23 W6 O30 24(7) . . . 2 ?
W8 O26 W6 O22 -151(4) . . . . ?
W8 O26 W6 O23 108(4) . . . . ?
W8 O26 W6 O25 16(7) . . . 2 ?
W8 O26 W6 O29 -54(4) . . . 2 ?
W8 O26 W6 O30 24(4) . . . 2 ?
W6 O23 W7 O24 161(7) . . . . ?
```

```
W6 O23 W7 O28 1(9) . . . . ?
W6 O23 W7 O27 60(7) . . . . ?
W6 O23 W7 O25 -98(7) . . . . ?
W6 O23 W7 O30 -26(7) . . . . ?
W10 O28 W7 O24 177.6(18) . . . . ?
W10 O28 W7 O23 -22(5) . . . . ?
W10 O28 W7 O27 -81.8(18) . . . . ?
W10 O28 W7 O25 76.2(18) . . . . ?
W10 O28 W7 O30 4.4(16) . . . . ?
W9 O27 W7 O24 150(3) . . . . ?
W9 O27 W7 O23 -109(3) . . . . ?
W9 O27 W7 O28 52(3) . . . . ?
W9 O27 W7 O25 -25(6) . . . . ?
W9 O27 W7 O30 -27(3) . . . . ?
W6 O25 W7 O24 -167(2) 2 . . . ?
W6 O25 W7 O23 91(2) 2 . . . ?
W6 O25 W7 O28 -67(2) 2 . . . ?
W6 O25 W7 O27 8(5) 2 . . . ?
W6 O25 W7 O30 9.7(17) 2 . . . ?
Si1 O30 W7 O24 158(11) . . . . ?
W6 O30 W7 O24 17(13) 2 . . . ?
W10 O30 W7 O24 -74(12) . . . . ?
Si1 O30 W7 O23 39(2) . . . . ?
W6 O30 W7 O23 -102.0(13) 2 . . . ?
W10 O30 W7 O23 166.9(13) . . . . ?
Si1 O30 W7 O28 -131(2) . . . . ?
W6 O30 W7 O28 87.9(14) 2 . . . ?
W10 O30 W7 O28 -3.3(12) . . . . ?
Si1 O30 W7 O27 -47(2) . . . . ?
W6 O30 W7 O27 171.9(15) 2 . . . ?
W10 O30 W7 O27 80.7(13) . . . . ?
Si1 O30 W7 O25 133(3) . . . . ?
W6 O30 W7 O25 -7.3(13) 2 . . . ?
W10 O30 W7 O25 -98.5(14) . . . . ?
W6 O26 W8 O35 125(4) . . . . ?
W6 O26 W8 O34 -133(4) . . . . ?
W6 O26 W8 O36 24(4) . . . . ?
W6 O26 W8 O39 -51(8) . . . . ?
W6 O26 W8 O37 -59(4) . . . . ?
W9 O34 W8 O35 -173.0(19) . . . . ?
W9 O34 W8 O26 84.8(19) . . . . ?
W9 O34 W8 O36 -13(5) . . . . ?
W9 O34 W8 O39 -78.7(18) . . . . ?
W9 O34 W8 O37 -0.2(15) . . . . ?
W10 O36 W8 O35 -110(3) 2 . . . ?
W10 O36 W8 O26 -9(3) 2 . . . ?
W10 O36 W8 O34 90(4) 2 . . . ?
W10 O36 W8 O39 155(3) 2 . . . ?
W10 O36 W8 O37 77(3) 2 . . . ?
P2 O39 W8 O35 129(3) . . . . ?
P2 O39 W8 O26 -55(7) . . . . ?
P2 O39 W8 O34 28(3) . . . . ?
P2 O39 W8 O36 -131(3) . . . . ?
P2 O39 W8 O37 -47(3) . . . . ?
Si1 O37 W8 O35 -158(10) . . . . ?
W9 O37 W8 O35 62(12) . . . . ?
Si1 O37 W8 O26 46(3) . . . . ?
W9 O37 W8 O26 -94.1(14) . . . . ?
Si1 O37 W8 O34 141(3) . . . . ?
W9 O37 W8 O34 0.2(11) . . . . ?
Si1 O37 W8 O36 -45(2) . . . . ?
W9 O37 W8 O36 175.1(14) . . . . ?
Si1 O37 W8 O39 -131(3) . . . . ?
W9 O37 W8 O39 88.2(14) . . . . ?
W7 O27 W9 O33 -124(3) . . . . ?
W7 O27 W9 O32 -23(3) . . . . ?
```

```
W7 O27 W9 O34 137(3) . . . . ?
W7 O27 W9 O38 62(7) . . . . ?
W7 O27 W9 O37 61(3) . . . . ?
W10 O32 W9 O33 115(3) . . . . ?
W10 O32 W9 O27 14(3) . . . . ?
W10 O32 W9 O34 -83(5) . . . . ?
W10 O32 W9 O38 -151(3) . . . . ?
W10 O32 W9 O37 -72(3) . . . . ?
W8 O34 W9 O33 173.4(18) . . . . ?
W8 O34 W9 O27 -86.1(18) . . . . ?
W8 O34 W9 O32 11(5) . . . . ?
W8 O34 W9 O38 79.9(18) . . . . ?
W8 O34 W9 O37 0.2(15) . . . . ?
P2 O38 W9 O33 -130(3) . . . . ?
P2 O38 W9 O27 44(7) . . . . ?
P2 O38 W9 O32 130(3) . . . . ?
P2 O38 W9 O34 -31(3) . . . . ?
P2 O38 W9 O37 45(3) . . . . ?
Si1 O37 W9 O33 168(9) . . . . ?
W8 O37 W9 O33 -52(10) . . . . ?
Si1 O37 W9 O27 -47(3) . . . . ?
W8 O37 W9 O27 92.1(13) . . . . ?
Si1 O37 W9 O32 44(3) . . . . ?
W8 O37 W9 O32 -176.3(13) . . . . ?
Si1 O37 W9 O34 -140(3) . . . . ?
W8 O37 W9 O34 -0.2(11) . . . . ?
Si1 O37 W9 O38 133(3) . . . . ?
W8 O37 W9 O38 -87.6(13) . . . . ?
W9 O32 W10 O31 -136(3) . . . . ?
W9 O32 W10 O36 120(3) . . . 2 ?
W9 O32 W10 O29 29(5) . . . . ?
W9 O32 W10 O28 -38(3) . . . . ?
W9 O32 W10 O30 38(3) . . . . ?
W6 O29 W10 O31 177.5(18) 2 . . . ?
W6 O29 W10 O36 -78.6(18) 2 . . 2 ?
W6 O29 W10 O32 13(4) 2 . . . ?
W6 O29 W10 O28 79.9(19) 2 . . . ?
W6 O29 W10 O30 3.1(15) 2 . . . ?
W7 O28 W10 O31 -179.7(19) . . . . ?
W7 O28 W10 O36 -7(4) . . . 2 ?
W7 O28 W10 O32 79.4(18) . . . . ?
W7 O28 W10 O29 -79.3(19) . . . . ?
W7 O28 W10 O30 -4.4(16) . . . . ?
Si1 O30 W10 O31 173(10) . . . . ?
W6 O30 W10 O31 -50(11) 2 . . . ?
W7 O30 W10 O31 43(11) . . . . ?
Si1 O30 W10 O36 -47(2) . . . 2 ?
W6 O30 W10 O36 89.3(13) 2 . . 2 ?
W7 O30 W10 O36 -177.6(14) . . . 2 ?
Si1 O30 W10 O32 45(2) . . . . ?
W6 O30 W10 O32 -178.6(13) 2 . . . ?
W7 O30 W10 O32 -85.5(12) . . . . ?
Si1 O30 W10 O29 -139(2) . . . . ?
W6 O30 W10 O29 -2.3(12) 2 . . . ?
W7 O30 W10 O29 90.7(13) . . . . ?
Si1 O30 W10 O28 134(2) . . . . ?
W6 O30 W10 O28 -89.8(13) 2 . . . ?
W7 O30 W10 O28 3.2(11) . . . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.749
_diffrn_reflns_theta_full              22.38
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.749
_refine_diff_density_max    3.189
_refine_diff_density_min   -3.105
_refine_diff_density_rms    0.536
```